

Zeitabhängige Störungstheorie

$$H = H_0 + V(t)$$

Wir: Zeitentwicklungsgenerator (Dirac-Bild)

$$U_D(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) \dots \hat{V}_D(t_n)$$

Zeitunabhängiges Potential

(in einem großen Zeitintervall)

$$\frac{\langle m | \hat{U}_D(\omega, \omega) | n \rangle}{\text{Eigenzustände zu } H_0} = d_{mn} - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle m | \hat{T}^+(E_n) | n \rangle_{\text{T-Matrix}} = S_{mn}$$

Element der S-Matrix!

physikalische Bedeutung: Übergangswahrscheinlichkeit $P_{n \rightarrow m} = |S_{mn}|^2$ für sehr große Zeiten!

erhält für
 $t \rightarrow 0$
 $t_0 \rightarrow -\infty$

$$\text{erhält: T-Matrix} \quad \hat{T} = \hat{V} + \hat{T} \hat{G}_0 \hat{V}$$

$$= \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} + \dots$$

Ausgangspunkt für Näherungen!

III.5.2. Fermi's Goldene Regel

Wir spezialisieren nun auf schwache Störungen $\hat{V}$, $\hat{V}$ konstant im betrachteten Zeitintervall (wird später "aufgelöst")

Annahme:
 $\rightarrow$ die formale Reihe für $\hat{U}_D(t, t_0)$ (in $\hat{V}$)

kann bereits nach dem ersten nichttrivialen Term ($\sim \hat{V}$) abgebrochen werden

$$(*) \quad \hat{U}_D(t, t_0) \approx 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \hat{V} e^{-i \frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t_1}$$

Annahme: $\hat{V}$ konstant zw. t_0 und t

Matrixelement $\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle$ (mit $|n\rangle, |m\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}_0$)

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle &= \langle n | n \rangle - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) t_1} \underbrace{\langle m | \hat{V} | n \rangle}_{\text{Zeit. Unveränd.}} \\ &= \underbrace{\langle n | n \rangle}_{\delta_{nm}} - i \langle m | \hat{V} | n \rangle \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) t_1} \end{aligned}$$

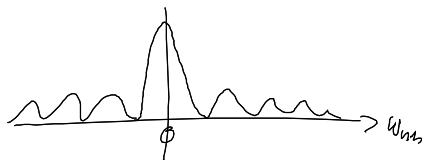
Berechnung $P_{n \rightarrow m}(t) = |\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle|^2$

Zustand, in den sich das System ausgehend vom Anfangszustand $|n\rangle$ zeitlich entwickelt
In allg. ist das nicht mehr Eigenzustand von $\hat{H}_0$!

Fokus auf den Fall $|m\rangle \neq |n\rangle$

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow m}(t) &= |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \left| \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) t_1} \right|^2 \\ &= |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{mn}(t-t_0)}{2}\right)}{\omega_{mn}/2} \right)^2 \quad \text{mit } \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) \end{aligned}$$

oszillierende Funktion, ~~aber~~ "gepeakt" bei $\omega_{mn} = 0$



Umgeschrieben als Übergangswahrsch.:

$$\begin{aligned} \frac{P_{n \rightarrow m}(t)}{t - t_0} &= |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \frac{1}{t - t_0} \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{mn}(t-t_0)}{2}\right)}{\omega_{mn}/2} \right)^2 \\ &= |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{mn}(t-t_0)}{2}\right)}{\omega_{mn}(t-t_0)/2} \right)^2 (t - t_0) \end{aligned}$$

Wir sind interessiert an $\lim_{t \rightarrow t_0} \rightarrow 0$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) = \delta(x) \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = 1$$

$$\text{hier: } f(y) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 y}{y^2} \quad \text{mit } y = \frac{x}{\varepsilon}, \quad x = \frac{E_{mn}}{\hbar} \\ \varepsilon = \frac{1}{t - t_0} \quad \text{also } \varepsilon \rightarrow 0 \stackrel{!}{=} (t - t_0) \rightarrow \infty$$

Ersetzen:

$$\Rightarrow \Gamma_{mn} = \lim_{(t-t_0) \rightarrow \infty} \frac{1}{t-t_0} P_{n \rightarrow m}(t)$$

$$= |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \pi \delta\left(\frac{E_{mn}}{\hbar}\right)$$

$$\boxed{\Gamma_{mn} = 2\pi \hbar |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n)}$$

Fermi's Goldene Regel für die Übergangsrate
im Fall einer Störung die über ein großes Zeitintervall
vorhanden ist!

Bemerkungen

- Das obige Ergebnis ist konsistent mit unserem Ergebnis der S-Matrix
im Fall $m \neq n$ und $\hat{T}^+(E) \approx \hat{V}$

$$\left(\overset{\text{wir haben}}{S_{mn}} = \delta_{mn} - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle m | \hat{T}^+(E_n) | n \rangle \right)$$

- Die Herleitung der Goldenen Regel ist eigentlich widersprüchlich:
Einerseits soll die Störung klein sein (damit 1. Ordnung - Störungstheorie gerechtfertigt)
andererseits haben wir die Stördauer $t - t_0$ unendlich groß gewählt ?!

"Ausweg": Wir nehmen an, dass die Stördauer groß ist gegenüber
mikroskopischen Relaxationsprozessen des Systems
(Zeit, die es braucht, bis der
neue Zustand eingestellt ist)

- In realen System muß man die ^{hier besuchte} Übergangsrate mit der Zustandsrate (Verteilung der Energieniveaus in einem Ensemble) mitteln $\rightarrow$ Delta-Fkt. nicht problematisch
(d.h. Integral über Energien)

- Man benötigt den Matrixelement $\langle m | \vec{V} | n \rangle$, z.B. $\vec{V}$ Dipoloperator im Falle einer elektr. Feldes

- ^{Hier:} $T_{mn} \neq 0$ nur für $E_m = E_n \Rightarrow$ Übergänge können im Falle der Zeit. Unstetigen Störung nur zw. Zuständen eines entarteten Energieniveaus auftreten!

- Zusammenhang zw. dem Ergebnis für die Übergangsrate T_{mn} und der Born'schen Näherung für die Streuamplitude

Sei $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ (freies Teilchen), Eigenzustände diese Wellen $|u\rangle, |u'\rangle$
Energien $E_u = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$T_{u \rightarrow u'} = 2\pi\hbar \delta(E_u - E_{u'}) |\langle u' | \vec{V} | u \rangle|^2$$

Anwendung in Abschn. 5: Formelumschreibung von $\vec{V}$ zum Vektor $\vec{q} = \vec{u}' - \vec{u}$

$$= 2\pi\hbar \delta(E_u - E_{u'}) \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \left| f_{\text{Born}}(k', k) \right|$$

Energienhaltigkeit
- elastische Streuung!

Streuamplitude in Born'scher Näherung!

Schlusssatz:

^{Fermi's} Eine "Goldene Regel" läßt sich auch für zeitabhängige Potentiale aufstellen

$$V \rightarrow \hat{V}(t)$$

$$\text{Setze wieder } \hat{U}_D(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t \hat{V}_D(t_1) dt_1$$

$$= 1 - i \int_{t_0}^t e^{+i\hat{H}_0(t-t_1)} \hat{V}(t_1) e^{-i\hat{H}_0(t_1-t_0)} dt_1$$

Betrachte wieder $P_{n \rightarrow m}(\epsilon)$ für $|m\rangle \neq |n\rangle$

$$P_{n \rightarrow m}(\epsilon) = \left| \int_{t_0}^{\epsilon} dt e^{i/\hbar (E_m - E_n)t} \langle m | \vec{V}(t) | n \rangle \right|^2$$

"Spezialfall": $\vec{V}(t) = \vec{V}_0 \cos \omega t$, $t \rightarrow t_0$

z.B. monochromatisches elektrisches Feld $\rightarrow \vec{V}_0$ Dipoloperator ($\vec{V} = e \vec{r} E_0 \hat{z}$)
 in z-Richtung

ladies
 Feldstärke
 Einheits-
 vektor in
 z-Richtung

Betrachte wieder Γ_{mn} $\epsilon \rightarrow 0 \rightarrow \infty$

Ergebnis (hier nur skizziert)

$$\Gamma_{mn} \sim \left(\delta(E_m - E_n + \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \right) \left(\langle m | \vec{V}_0 | n \rangle \right)^2 \quad (\otimes \otimes)$$

Übergänge zw. den stationären Zuständen $|n\rangle, |m\rangle$ können dann stattfinden wenn die Frequenz des eingestrahlten Feldes (ω)

gerade mit der Energiedifferenz $E_m - E_n$ bzw. $E_n - E_m$ übereinstimmt!

Interpretation: Induzierte Absorption bzw. Emission eines Lichtquants

$E_m - E_n = \hbar\omega$: Das ungestörte System (Atom) absorbiert ein Lichtquant (Photon) und wechselt damit in ein Niveau mit $E_m > E_n$
 (siehe z.Teil in $\otimes \otimes$)
 „induzierte Absorption“

$E_m - E_n = -\hbar\omega$
 $E_n - E_m = \hbar\omega$ Die Störung führt dazu, dass das System die Energie $\hbar\omega$ emittiert
 $\Rightarrow$ „induzierte Emission“

aber keine Beschreibung von spontaner Emission!

IV. Licht und Materie

Ziel: Analyse des elektromagnetischen Feldes und Beschreibung seiner Wechselwirkung mit Materie (z.B. Ladungen u. Atomen, Molekülen)

⇒ z.B. Prozess der spontanen Emission

IV. 1. Gekoppelte Schwingungen, Phononen

Ausgangspunkt: Betrachte — zunächst klassisch — ein System, dessen potentielle Energie geschrieben werden kann als Entwicklung um Minimum („Ruhelage“)

$$\tilde{V}(\underline{x}) = \tilde{V}(\underline{x}_0) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \sum_{j=1}^f \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial x_i \partial x_j} \bigg|_{\underline{x}_0} q_i q_j + \mathcal{O}(q^3)$$

(Vektor mit f Komponenten)

$\underline{q} = \underline{x} - \underline{x}_0$
Auslenkungen um die Ruhelage

Physikal. Beispiel: Atome in einem periodischen Gitter
 $\underline{x}_0$: Ruhelagen der Atome, $\nabla_{\underline{x}} \tilde{V}(\underline{x}) \big|_{\underline{x}_0} = 0$

Kleine Auslenkungen (kleine Schwingungen) transponierter Vektor

$$\Rightarrow V(\underline{x}) = V(\underline{x}_0) + \frac{1}{2} \underline{q}^T \underline{V} \underline{q}$$

Matrix der 2. Ableitungen von L

Klass. Lagrangefunktion (q : generalisierte Koordinaten)

$$L = \underbrace{\frac{1}{2} \dot{q}^T \underline{T} \dot{q}}_{\text{kinetische Energie}} - \frac{1}{2} q^T \underline{V} q \quad (*)$$

(meist: $\underline{T} \sim \underline{I}$ - Einheitsmatrix)

beschreibt System von f gekoppelten harmonischen Oszillatoren

Entkopplung des Problems durch Einführung von Normalkoordinaten

Ziel:
$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f (\dot{Q}_i^2 - \lambda_i Q_i^2) = \frac{1}{2} \dot{\underline{Q}}^T \underline{Q} - \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i Q_i^2$$

$$\underline{q} = \underline{A} \underline{Q} \iff \underline{Q} = (\underline{A})^{-1} \underline{q}$$

Matrix $\underline{A}$ besteht aus Spalten, die den 'Normalmoden' entsprechen

Bestimmung von $\underline{A}$, λ

verallg. Eigenwertproblem: Setze $\underline{q} = \underline{A} \underline{Q}$ im Ausdruck für L (siehe $(*)$)

es muß gelten: $\underline{A}^T \underline{T} \underline{A} = \underline{1}$ (Einheitsmatrix), $\underline{A}^T \underline{V} \underline{A} = \lambda \underline{1}$

$$\Rightarrow \underline{A}^T \underline{V} \underline{A} = \underbrace{\underline{A}^T \underline{T} \underline{A}}_{\underline{1}} \lambda \iff \underline{V} \underline{A} = \underline{T} \underline{A} \lambda \underline{1}$$

$$\underline{V} \underline{q}_i = \underline{T} \underline{q}_i \lambda_i$$

Spaltenvektoren von $\underline{A}$
(Normalmoden)

$\Rightarrow$ nichttriv. Lösung nur für $\det(\underline{V} - \lambda \underline{T}) = 0$

meist setzt man $\lambda_i = \omega_i^2$

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f (\dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2)$$

Dynamik aus $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \ddot{Q}_i} = 0 \quad \forall i=1, \dots, f$

$$\Rightarrow \ddot{Q}_i(t) + \omega_i^2 Q_i(t) = 0$$

f entkoppelte Oszillatoren

Lösung: $Q_i(t) = \alpha_i e^{i\omega_i t} + \beta_i e^{-i\omega_i t}$

Konstanten aus Anfangsbedingungen

Zugehörige Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{i=1}^f \dot{Q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_i} - \mathcal{L} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_i} = P_i$$

kanonischen Impuls

(hier $P_i = \dot{Q}_i$, also Masse gleich 1)

$$\Rightarrow H = \sum_{i=1}^f \left(\frac{1}{2} P_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_i^2 \right)$$

Bemerkungen:

- Die in Zuge der Entkopplung eingeführten Normalmoden $Q_i(t)$ entsprechen Kollektiven Schwingungen, da sie mehrere Atome involvieren (ist alle)
- In der Festkörperphysik heißen diese Schwingungen Phononen